



TITLE:

# 液相反応乱流場でのLarge-Eddy Simulation (乱流構造の数理 : 発生・動力学・統計・応用)

AUTHOR(S):

道岡, 武信; 小森, 悟

---

CITATION:

道岡, 武信 ...[et al]. 液相反応乱流場でのLarge-Eddy Simulation (乱流構造の数理 : 発生・動力学・統計・応用). 数理解析研究所講究録 2001, 1226: 131-139

ISSUE DATE:

2001-07

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/41392>

RIGHT:

## 液相反応乱流場での Large-Eddy Simulation

京都大学 道岡 武信 (Takenobu Michioka)・小森 悟 (Satoru Komori)

Department of Mechanical Engineering  
Kyoto Univ.

### 1 緒言

乱流場で乱流混合の影響を受けながら化学反応が進行する現象は、 $\text{NO}_x$ ,  $\text{SO}_x$  などの反応性汚染物質が大気中を乱流拡散する場合のような環境中の流れや、燃焼・反応器のような工業装置内の流れの中に数多く見られる。このような反応乱流場での混合反応過程の解明や反応の進行状況を数値計算により精度良く予測することは工学的に非常に重要である。

近年、スーパーコンピュータの発達によりナビエ・ストークス方程式や物質の拡散方程式を乱流モデルを用いずに直接差分して解く直接数値計算 (DNS) が行われているが、DNS を適用できる流れ場はレイノルズ数やシュミット数の低い流れ場に限定されている。これに対し、LES (Large-Eddy Simulation) はレイノルズ数やシュミット数の高い流れ場までも予測できるため、有効な計算手法と考えられている。しかし、LES ではフィルタ幅より小さなスケール (Subgrid-Scale: SGS) に対して適切なモデルを用いなければならないという問題点がある。SGS 応力や SGS 乱流物質流束に関しては多くの研究者によりいろいろなモデル<sup>1~4)</sup> が提案されており、乱流場に対して盛んに LES が適用されるようになってきた。

しかし、大気・海洋等の環境乱流中で反応性汚染物質が拡散する場合や化学反応器内の乱流混合の場合に見られる化学反応を伴う乱流場に対して LES を適用する場合には、反応項に対して適切な SGS モデルを与えることが問題となるため、適用例は数少ない<sup>5,6)</sup>。特に、適度に速い反応 (化学反応と乱流混合の時間スケールが同程度の反応) が起こる反応乱流場を LES を用いて計算する場合、サブグリッドスケールでの物質の混合状態を無視したプリミティブなモデルを適用せざるをえない状況にある。しかし、このモデルを用いるとフィルタ内では完全混合を仮定することになるので反応項つまり、反応量に大きな誤差が生じると考えられる。したがって、フィルタ操作を施した反応項に対して適切な SGS モデルを考案することが強く要望されている。

そこで、本研究では適度に速い二次の不可逆反応を伴う気相の格子乱流場に対して DNS を実行し、その DNS から得られた濃度統計量に関するデータを用いてサブグリッドスケールでの物質の混合状態を考慮した LES 用の反応項のモデルを構築することを目的とした。さらに、液相の反応格子乱流場に対する室内実験<sup>7,8)</sup> と同様の条件下で LES を実行し、LES から得られた結果と室内実験値とを比較することにより、LES の中で使用した SGS モデルの液相への適用性について検討を行った。

### 2 Large-Eddy simulation

連続の式、Navier-Stokes (N-S) 方程式、および物質の拡散方程式にフィルタ操作を施すことにより、上付きで示すグリッドスケール (Grid Scale: GS) 成分に対する LES の支配方程式を得ることができる。

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial t} + \overline{U}_j \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \overline{U}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \overline{\Gamma}_i}{\partial t} + \overline{U}_j \frac{\partial \overline{\Gamma}_i}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \overline{\Gamma}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_{ij}}{\partial x_j} + \overline{\omega} \quad (3)$$

式 (2), (3) 中に現れる  $\tau_{ij}$  および  $q_{ij}$  はそれぞれフィルタ操作によって現れる SGS 応力, SGS 乱流物質流束であり, 次式で表される.

$$\tau_{ij} = \overline{U_i U_j} - \overline{U}_i \overline{U}_j \quad (4)$$

$$q_{ij} = \overline{\Gamma_i U_j} - \overline{\Gamma}_i \overline{U}_j \quad (5)$$

また, 式 (3) 中に現れる  $\overline{\omega}$  はフィルタ操作を施した反応項であり, 本研究では二次の不可逆反応を想定しているので次式で表される.

$$\overline{\omega} = Da \overline{\Gamma_A \Gamma_B} \quad (6)$$

ここで,  $Da (= kLC_{A0}/U_{ave})$  はダムケラ数である. 式 (4)~(6) は直接差分化して解くことができない SGS 成分を含んでいるので, それらに対して適切な SGS モデルを与える必要がある. SGS 応力および SGS 乱流物質流束に対しては Smagorinsky モデル<sup>1)</sup> や Dynamic Subgrid-scale モデル<sup>2~4)</sup> などの数多くのモデルが提案されている. しかしながら, フィルタ操作を施した反応項に対してはモデルがほとんど提案されていない. よって, この反応項のモデルを構築することが反応乱流場に LES を適用する上で最も重要となる.

### 3 SGS 反応モデル

#### 3.1 瞬間反応

瞬間反応が起こる場合, つまり, 化学反応の時間スケール  $\tau_c$  が乱流混合の時間スケール  $\tau_t$  に比べて十分小さい場合 ( $\tau_c \ll \tau_t$ ) には, LES での計算の時間刻み  $\Delta t$  を  $\tau_c$  (本研究では  $\tau_c = 1.0 \times 10^{-9}$  s) より十分小さく設定しなければならない. しかしながら, 現在のスーパーコンピュータを用いてもこのような小さな時間刻みを設定することはできないため, 式 (3) を解くことは困難である.

そこで, Cook ら<sup>6)</sup> は化学反応が起こっても不変な保存スカラー  $Z$  (conserved scalar) を用い, それより GS での化学物質の濃度を求める手法を提案した. 本研究では反応系を二次の不可逆反応 ( $A + B \rightarrow P$ ) と仮定したため,  $Z$  は次式のように表される.

$$Z = \Gamma_A - \Gamma_B \quad (7)$$

さらに,  $Z$  を正規化した変数  $\zeta$  を次式のように定義する.

$$\zeta = \frac{Z - Z_{B0}}{Z_{A0} - Z_{B0}} \quad (0 \leq \zeta \leq 1) \quad (8)$$

ここで,  $Z_{A0}$  および  $Z_{B0}$  はそれぞれ計算領域の入口断面における反応物質  $A$  が供給される側 ( $Z_{A0} = \Gamma_{A0}$ ), 反応物質  $B$  が供給される側の  $Z$  の値 ( $Z_{B0} = -\Gamma_{B0}$ ) である.

LESにおいて $\zeta$ の拡散方程式は式(3)において反応項 $\bar{\omega}$ を除いた次式となる.

$$\frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \bar{\zeta}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (9)$$

反応が瞬間反応であるため反応物質 A と反応物質 B は局所的には共存しないという仮定を用いると, 物質 A, B および P の局所濃度は $\zeta$ を用いて以下のように表される.

$$\Gamma_A(\zeta) = \begin{cases} 0 & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ (\zeta - \zeta_{st})/(1 - \zeta_{st}) & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \quad (10)$$

$$\Gamma_B(\zeta) = \begin{cases} -(\zeta - \zeta_{st})/\zeta_{st} & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ 0 & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \quad (11)$$

$$\Gamma_P(\zeta) = \begin{cases} \zeta/\zeta_{st} & (\zeta \leq \zeta_{st}) \\ (1 - \zeta)/(1 - \zeta_{st}) & (\zeta > \zeta_{st}) \end{cases} \quad (12)$$

ここで,

$$\zeta_{st} = \frac{\Gamma_{B0}}{\Gamma_{A0} + \Gamma_{B0}} \quad (13)$$

しかしながら, 式(9)からもわかるように, LES では $\zeta$ を直接計算することができない. 仮に, 式(9)から得られた $\bar{\zeta}$ を $\zeta = \bar{\zeta}$ と仮定して式(10)~(12)に代入すると, それらの式はSGSを考慮せずLESでの計算格子内を完全混合としたプリミティブなモデルを使用したのと同じになる. よって, SGSでの $\zeta$ の混合状態を考慮するため, SGSでの確率密度関数 $P(\zeta)$ を用いて以下に示すSGSモデルが提案された<sup>6)</sup>.

$$\bar{\Gamma}_i = \int_0^1 \Gamma_i(\zeta) P(\zeta) d\zeta \quad (14)$$

$\Gamma_i(\zeta)$ には式(10)~(12)が,  $P(\zeta)$ には以下に示す $\beta$ -PDFモデルが適用された.

$$P(\zeta) = \frac{\zeta^{a-1}(1-\zeta)^{b-1}}{B(a,b)} \quad (15)$$

ここで,

$$a = \bar{\zeta} \left( \frac{\bar{\zeta}(1-\bar{\zeta})}{\bar{\zeta}^2} - 1 \right), \quad b = (a/\bar{\zeta}) - a$$

$$B(a,b) = \int_0^1 \zeta^{a-1}(1-\zeta)^{b-1} d\zeta$$

しかし, 式(15)で示す $\beta$ -PDFモデルには, LESでは直接計算することができないSGSでの濃度分散 $\overline{\zeta'^2}$ を入力しなければならないという問題点がある. そこで, LESのフィルタ幅(計算格子幅)より大きなフィルタ幅 $\tilde{\Delta}$ ( $=2\bar{\Delta}$ )をもつテストフィルタを施すことによりその領域内の濃度分散 $\widetilde{\zeta'^2}$ を求め, 次に示すようにSGSでの濃度分散 $\overline{\zeta'^2}$ は $\widetilde{\zeta'^2}$ との間に一定の相関関係をもつと仮定する.

$$\overline{\zeta'^2} \approx c_f \widetilde{\zeta'^2} = c_f (\widetilde{\zeta^2} - \bar{\zeta}^2) \quad (16)$$

ここで,  $c_f$ は相関係数である. この $c_f$ の値さえ決定されれば式(9)~(16)を用いることにより, LESにより直接計算することが可能であるGSでの保存スカラ $\bar{\zeta}$ のみからそれぞれの化学物質のGSでの濃度を求めることができる.

### 3.2 適度に速い反応

フィルタとして体積フィルタを用いると反応項  $Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B}$  は次式のように2つの項に分解される。

$$Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B} = Da(\overline{\Gamma_A}\overline{\Gamma_B} + \overline{\gamma_A\gamma_B}) \quad (17)$$

ここで、 $\gamma_i$  は SGS での濃度変動である。この反応項  $Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B}$  に対するプリミティブなモデルは次式で示す SGS での物質の混合状態を無視した ( $\gamma_i = 0$ ) モデルである。

$$Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B} = Da\overline{\Gamma_A}\overline{\Gamma_B} \quad (18)$$

しかし、このモデルはフィルタ内を完全混合 ( $\overline{\gamma_i^2} = 0$ ) として計算を行うので、フィルタ内に濃度むらが存在する場合 ( $\overline{\gamma_i^2} \neq 0$ ) には、反応項を精度良く計算することができない。そこで、本研究ではフィルタ内での物質の混合状態を考慮したモデルを濃度  $\Gamma_A$  の SGS での確率密度関数  $P(\Gamma_A)$  と濃度  $\Gamma_A$  が存在しているときの SGS での  $\Gamma_A\Gamma_B$  の条件付き期待値  $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  とを用いて以下のように提案した。

$$Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B} = Da \int_0^1 P(\Gamma_A) \langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle d\Gamma_A \quad (19)$$

この式において  $P(\Gamma_A)$  および  $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  に対して適切なモデルを与えることにより、反応項  $Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B}$  を計算することが可能である。 $P(\Gamma_A)$  に対しては  $\beta$ -PDF モデルを適用するが、 $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  に対する既存のモデルはないので適切なモデルを考案しなければならない。そのためには、何らかの方法で  $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  の正確な値を得る必要がある。 $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  の値を実験的に求めることは難しいので、本研究では、気相格子乱流場に対して DNS を実行することにより  $\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle$  の値を求め、そのデータを基にして以下のようなモデルを考案した<sup>9)</sup>。

$$\langle \Gamma_A\Gamma_B | \Gamma_A \rangle = \alpha \left\{ -\beta \left( \Gamma_A - \frac{1 - \overline{\Gamma_P}}{2} \right)^2 + \frac{1}{4} (1 - \overline{\Gamma_P})^2 \right\} \quad (20)$$

$$\alpha = \alpha_1 \cdot \alpha_2$$

$$\alpha_1 = \begin{cases} -(\overline{\Gamma_A} - 1.0)^{16} + 1.0 & (\overline{\Gamma_A} \leq \overline{\Gamma_B}) \\ -(\overline{\Gamma_B} - 1.0)^{16} + 1.0 & (\overline{\Gamma_B} \leq \overline{\Gamma_A}) \end{cases} \quad \alpha_2 = \frac{0.25(1.0 - \overline{\Gamma_P})^2 - C_\alpha \sqrt{\overline{\gamma_P^2}}}{0.25(1.0 - \overline{\Gamma_P})^2} \quad (C_\alpha = 0.2)$$

$$\beta = \left\{ 1 - \overline{\Gamma_P} \cdot \left[ \Gamma_A + \frac{(1 - \overline{\Gamma_P})}{2} \right] \right\}^2 \quad [ ] : \text{ガウス記号}$$

サブグリッドスケールでの物質の混合を考慮した反応項  $Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B}$  のモデルは式 (19), (20) により与えられ、 $\overline{\Gamma_A}, \overline{\Gamma_B}, \overline{\Gamma_P}, \overline{\gamma_A^2}, \overline{\gamma_P^2}$  の値をモデルに入力することにより  $Da\overline{\Gamma_A\Gamma_B}$  の値を計算することが可能となる。

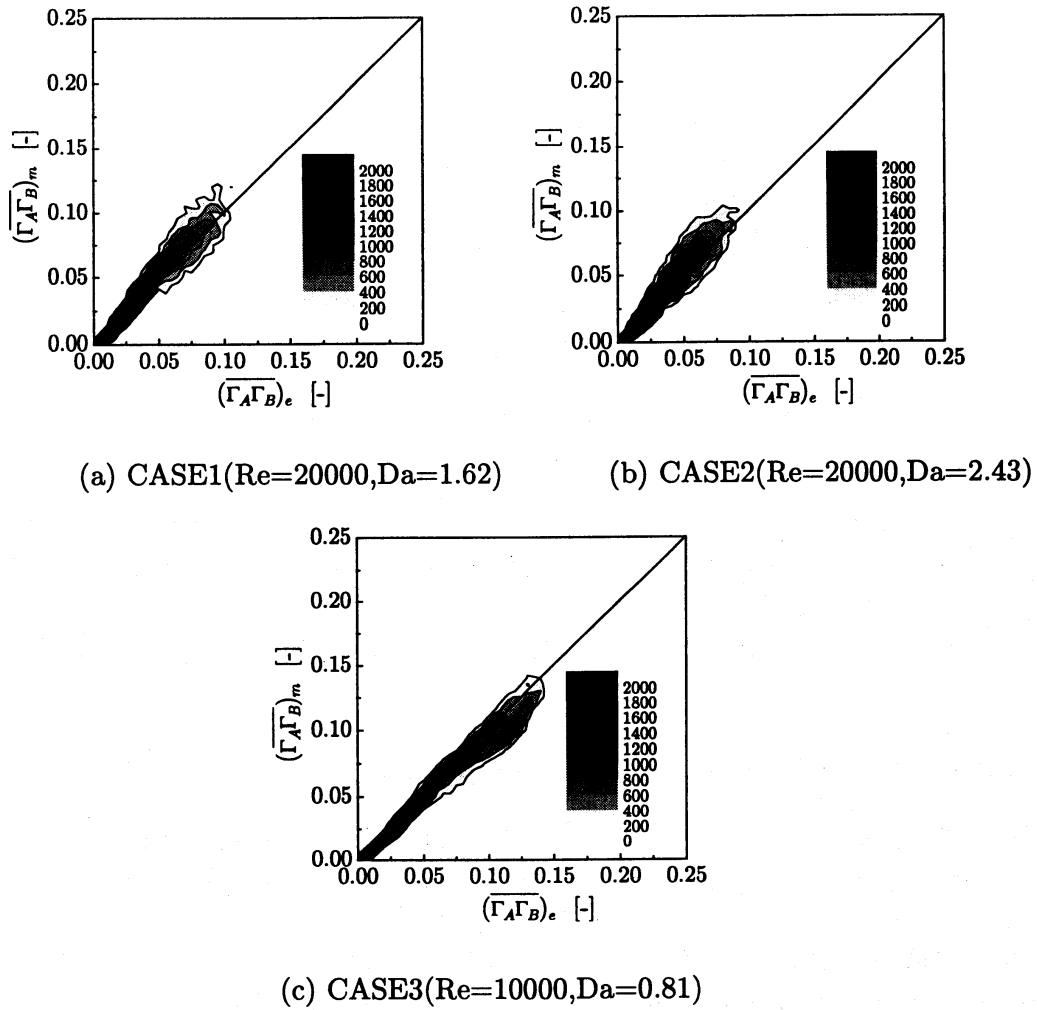


Fig.1 Comparisons of joint probability density functions of  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  by the present model (Eq.(19)) and those by the DNS.

#### 4 モデルの精度

条件付き期待値のモデルを開発する際に用いたのと同じ計算条件 (CASE1) に対して, 反応項に対するプリミティブなモデルおよび本研究で提案した SGS モデルの精度を検討するため, モデルから求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  と DNS によるデータから直接求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  とを比較した. さらに, モデルの汎用性を検討するため, ダムケラ数を変化させた場合 (CASE2) およびダムケラ数とレイノルズ数の両方を変化させた場合 (CASE3) の 2 つの場合に対しても DNS を実行し, モデルから求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  と DNS によるデータから直接求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  とを比較した.

図 1 に 3 つの条件下 (CASE1~CASE3) において本 SGS モデルより求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  ( $(\overline{\Gamma_A \Gamma_B})_m$ ) と DNS のデータから直接求めた  $\overline{\Gamma_A \Gamma_B}$  ( $(\overline{\Gamma_A \Gamma_B})_e$ ) との結合確率密度関数の等高線分布を示す. ただし, SGS での濃度分散には, 式 (16) と同様な次式を用いた.

$$\overline{\gamma_i^2} \approx c_f' \widetilde{\gamma_i^2} = c_f' (\widetilde{\Gamma_i^2} - \widetilde{\Gamma_i}^2) \quad (21)$$

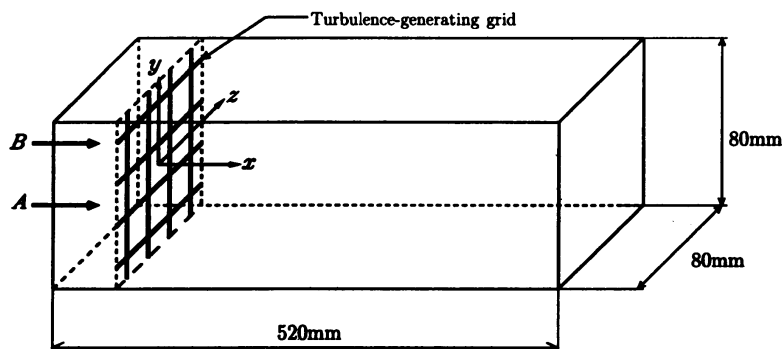


Fig.2 Schematic of the computational region

ここで、 $c_f$  は相関係数であり、CASE1でのDNSによる計算値より、気相では $c_f$ の値が1.0であることを確認した。全ての条件下で若干のばらつきは見られるものの、 $(\Gamma_A \Gamma_B)_m$ と $(\Gamma_A \Gamma_B)_e$ の間には良好な相関関係が見られる。さらに、この反応項のSGSモデルはレイノルズ数やダムケラ数にも依存しない。よって、本SGSモデルは反応項のモデルとして妥当であることがわかる。

## 5 液相に対する Large-Eddy Simulation

本研究で提案した反応項のモデルが液相反応乱流場に対して適用可能かどうかの検討をするため、Komoriら<sup>7,8)</sup>が行った化学反応を伴う液相格子乱流場にの室内実験と同様な系に対してLESの実行を試みた。

計算領域の概略図を図2に示す。計算領域は実次元で $520 \times 80 \times 80\text{mm}$ の直方体であり、室内実験を行ったのと同じ格子乱流場を再現するために、計算領域入り口から $0.02\text{m}(=M)$ の位置に乱流格子(格子間隔 $M=0.02\text{m}$ )を設置した。ただし、実験で用いた円形の乱流格子を数値実験で再現することは極めて困難であるため、一辺が $0.002\text{m}$ の角柱で乱流格子を近似した。

LESにおいて流れ場を支配する方程式は、それぞれフィルタ操作を施した連続の式、N-S方程式および物質拡散の方程式であり、式(1)~(3)である。支配方程式を有限体積法に基づき離散化し、HSMAC法により解を求めた。式(2)および式(3)中に現れるSGS応力およびSGS乱流物質流束にはDynamic SGSモデル<sup>2~4)</sup>を用いた。離散化については、対流項および粘性項ともに二次精度の中心差分を、時間積分には陽解法である二次精度のRunge-Kutta法を用いた。座標系を主流方向に $x$ 、鉛直方向に $y$ およびスパン方向に $z$ とし、原点( $x=y=z=0$ )を乱流格子面の中心とした。すなわち、計算領域が $-1 \leq x/M \leq 25$ ,  $-2 \leq y/M, z/M \leq 2$ となるように座標系を設定した。計算格子には乱流格子近傍に密とする不等間隔のスタッガード格子を用い、 $x$ 方向に280、 $y$ 方向に80および $z$ 方向に80とした。境界条件として、計算領域入口に一樣流( $U=1, V=W=0$ )を与え、計算領域側面境界にslip wall条件、乱流格子壁面にno-slip条件、出口境界には対流型境界条件を用いた。

瞬間反応が起こる場合の反応系には酢酸( $\text{CH}_3\text{COOH}$ :成分A)と水酸化アンモニウム( $\text{NH}_4\text{OH}$ :成分B)(ともに初期濃度 $10\text{mol/m}^3$ )の反応



を想定した。この場合の反応速度定数は $k \approx 10^8 \text{m}^3/(\text{mol s})$ であり、ダムケラ数 $Da(=kMC_{A0}/U_{ave})$

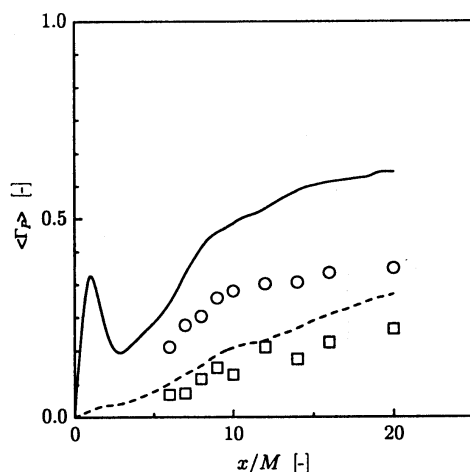


Fig.3 Streamwise distributions of the mean concentration of chemical product P. Symbols denote the measurements and the lines are the results of the LES based on the primitive model:  $\circ$ , —, rapid reaction;  $\square$ , - -, moderately fast reaction.

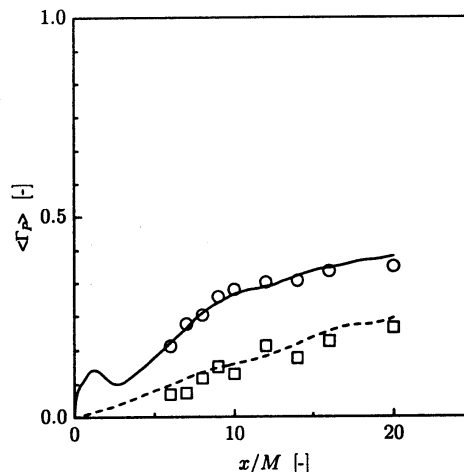


Fig.4 Streamwise distributions of the mean concentration of chemical product P. Symbols denote the measurements and the lines are the results of the LES by the present SGS model. Symbols as in Fig. 3.

は  $8.0 \times 10^7$  である.

また、適度に速い反応が起こる場合の反応系には水酸化ナトリウム (NaOH:成分 A) とギ酸メチル (HCOOCH<sub>3</sub>:成分 B) (ともに初期濃度 100mol/m<sup>3</sup>) の反応



を想定した. この場合の反応速度定数は  $k \approx 0.02\text{m}^3/(\text{mol s})$  であり, ダムケラ数  $Da$  は 0.16 である.

無次元化した計算時間刻み  $\Delta t$  は 0.008 であり, 時間平均量を流れが定常状態になる 10000 ステップ目から 30000 ステップ目までの値を平均することにより求めた.

## 6 結果および考察

液相の化学反応を伴う乱流場に LES を適用する場合に SGS モデルを用いる必要があるのかどうかを明確にするため, 図 3 に SGS モデルを用いなかった場合 (瞬間反応の場合では式 (10)~(12) において  $\zeta = \bar{\zeta}$  と仮定, 適度に速い反応の場合では式 (18)) の生成物質 P の時間平均濃度の主流方向分布を示す. 瞬間反応が起こる場合 (実線:LES,  $\circ$ 印:実験値) では乱流格子 ( $x/M=0$ ) 直後で過剰に生成物質が現れ, 全体的にも実験値より約 2 倍程度生成物質の量が多く見積られることがわかる. また, 適度に速い反応を伴う場合 (破線:LES,  $\square$ 印:実験値) でも瞬間反応ほど大きな差異は見られないものの, 生成物質が多く見積もられることがわかる. したがって, SGS モデルを用いず LES を実行すると反応生成物質の量を過剰に評価することになる.

図 4 に SGS モデルを用いて LES を行った場合 (瞬間反応の場合には式 (9)~(15), 適度に速い



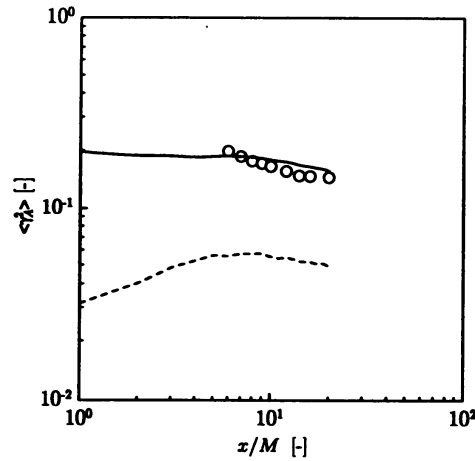


Fig.5 Streamwise distributions of the mean squared concentration fluctuations of chemical species A in a reacting flow with a rapid reaction: ○, EXP; --, by the conventional LES; —, by the corrected LES with the SGS variance.

反応の場合には式 (19)～式 (21) の生成物質  $P$  の時間平均濃度の主流方向分布を示す。なお、式 (16) 中の  $c_f$  および式 (21) 中の  $c'_f$  には両ケースとも液相定常等方性乱流場での DNS から得られた  $5.0^{10}$  を用いた。瞬間反応および適度に速い反応を伴う場合の両者とも主流方向の全領域において実験値と良好に一致することがわかる。

図 5 に瞬間反応を伴う場合での反応物質  $A$  の時間平均濃度変動強度の主流方向分布を示す。この図より、従来の LES から得られた濃度変動強度 (破線) は実験値 (○印) よりかなり小さくなることがわかる。この原因は LES から得られた濃度変動強度には計算格子幅 (約 2mm) より小さなスケール (SGS) での濃度変動の影響を考慮することができないためである。そこで、SGS での濃度分散を考慮できるように次式を提案した。

$$\begin{aligned} \langle \gamma_A^2 \rangle &= \langle \overline{\Gamma_A}^2 \rangle - \langle \overline{\Gamma_A} \rangle^2 \\ &+ c'_f \langle \widetilde{\overline{\Gamma_A}^2} - \widetilde{\overline{\Gamma_A}}^2 \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

液相での値である  $c'_f = 5.0$  を用い、上式を用いると LES から得られた結果 (実線) は実験値 (○印) に良好に一致することがわかる。よって、LES でも時間平均化された濃度変動強度を精度良く求めることが可能である。なお、適度に速い反応を伴う場合については鉛直方向の反応物質  $A$  の時間平均濃度および濃度変動強度に関する既往の室内実験データが存在しないため比較することができなかった。

以上のことより、本研究で提案した濃度変動強度に関するモデル (式 (24)) を用いることにより、液相の反応乱流場に対しても濃度変動強度を求めることが可能となった。

## 7 結言

気相格子乱流場に DNS を適用することにより得られた数値計算データを用いて LES 用のフィルタ操作を施した反応項のモデルを提案した。また、液相の反応格子乱流場に対して LES を実行し、室内実験データと比較することにより液相の反応乱流場への LES の適用性について検討

した。また、シュミット数の大きな液相の反応乱流場において時間平均化された濃度変動強度を求めることを可能にする新しい方法を提案した。

以上のことから次の結論を得た。

(1) SGS での確率密度関数にはベータ PDF モデルを SGS での条件付き期待値に対しては本研究で提案したモデルを用いることにより式 (19) で反応項を表すことができ、GS での反応物質と生成物質の濃度のみから、SGS での化学反応と物質の混合状態を考慮した LES を実行することが可能である。

(2) 液相では、LES から得られたデータから時間平均化された濃度変動強度  $\langle \gamma_A^2 \rangle$  を求めると過小評価になる。これは、LES の結果には SGS での濃度変動  $\gamma'_A$  が考慮されないためである。しかし、本研究で提案した SGS での濃度変動を考慮したモデル (式 (24)) を用いることにより時間平均化された濃度変動強度を正確に評価することが可能になる。

(3) 相関係数  $c_f$  および  $c'_f$  に最適値を与えることにより、化学反応を伴う格子乱流場で得られた室内実験結果を LES を用いて説明することができる。

### 謝辞

本研究は新規産業創造型提案公募事業 (プロジェクト番号 99E 省 04-001-1) の援助を受けて行われた。

### 文 献

- (1) Smagorinsky, J., *Mon. Weather Rev.*, **91** (1963), 99-165.
- (2) Lilly, D. K., *Phys. Fluids*, A, **4** (3) (1992), 633-635
- (3) Geromano, U., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W. H., *Phys. Fluids*, A, **3** (7) (1991), 1760-1765
- (4) Pilomelli, U. and Liu, J., *Phys. Fluids*, A, **7** (4) (1995), 839-848
- (5) Gao, F. and O'Brien, E. E., *Phys. Fluids*, A, **5** (8) (1994), 1282-1284
- (6) Cook, A. W. and Riley, J. J., *Phys. Fluids*, **6** (8) (1994), 2868-2870
- (7) Komori, S., Nagata, K., Kanzaki, T. and Murakami, Y., *AIChE J.*, **39**-10, (1993), 1611-1620
- (8) Komori, S., Kanzaki, T. and Murakami, Y., *J. Chem. Eng. Jpn.*, **27**-6, (1994), 742-748
- (9) 道岡・小森, 機論, **65**-631, B (1999), 839-846
- (10) 道岡・長田・井田・小森, 機論, **65**-651, B (2000), 2815-2822